



TITLE:

硫黄を含むジペプチド保護体のCO₂吸着状態の解析

AUTHOR(S):

津江, 広人

CITATION:

津江, 広人. 硫黄を含むジペプチド保護体のCO₂吸着状態の解析. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2018, 2017: 59-59

ISSUE DATE:

2018-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/230759>

RIGHT:

硫黄を含むジペプチド保護体の CO₂ 吸着状態の解析

Analysis of the CO₂ sorption state of protected dipeptide containing sulfur atom

京都大学 大学院人間・環境学研究科 相関環境学専攻 分子・生命環境論講座
津江広人

研究成果概要

多孔性材料は、気体分子の分離・精製・貯蔵などの用途に幅広く適用可能なため、古くから研究され、現在でもなお新規材料の開拓が活発に進められている。これまでに当研究室では、有機分子性結晶が発現する気体吸着特性の解明を目的として、安価かつ生体適合性をもつジペプチドに着目し、その結晶構造と気体吸着挙動の関係について報告してきた。その研究過程において、N 末端と C 末端の両方を保護した Boc-L-Met-L-AlaOMe (以下、**1** と略記。図 1) の単結晶が、二酸化炭素を高選択的に吸着することが明らかになっている。また、**1** の結晶が二酸化炭素を吸着した状態の結晶構造解析を行い(図2)、結晶を構成する**1**と結晶中に吸着された二酸化炭素との間に働く分子間相互作用の解析を行った結果、**1** と二酸化炭素との間には主として分散力が働いていることが判明している。

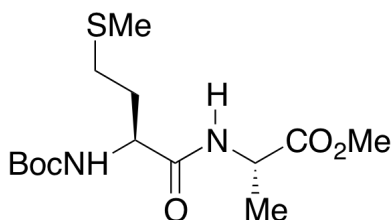


図1 **1** の分子構造

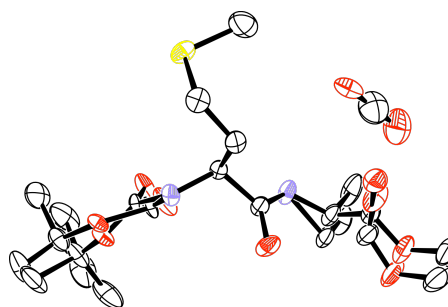


図2 **1** の CO₂ 吸着状態の OTREP 図

本研究では、**1** が示す二酸化炭素に対する親和性をより詳細に解明することを目的として、**1** と二酸化炭素との間に働く分子間相互作用の再解析を行った。ここでは、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用した。

具体的には、結晶中で二酸化炭素とその周辺に存在する四分子の **1** との分子間相互作用を解析した。計算化学アプリケーション Materials Studio を用いて、二酸化炭素の吸着状態の原子座標から結晶構造の最適化を行った後、Gaussian 09 を用いて MP2 レベルで BSSE 補正を加えたエネルギー分割計算を行った。その結果、二酸化炭素と **1** との分子間相互作用には、軌道の重なりが原因となる短距離力とクーロン力が原因となる長距離力が関与しており、前者は斥力として働いている一方、後者は引力として働いていることが明らかとなった。